



TITLE:

ランダム初期ベクトルサンプリングを用いたランチョス法による強
相関電子系の擬ギャップの研究
(2000年度基礎物理学研究所研究会
「モンテカルロ法の新展開2」,研
究会報告)

AUTHOR(S):

坂井, 徹; 高橋, 慶紀

CITATION:

坂井, 徹 ...[et al]. ランダム初期ベクトルサンプリングを用いたランチョス法による強相
関電子系の擬ギャップの研究(2000年度基礎物理学研究所研究会「モンテカルロ法の新
展開2」,研究会報告). 物性研究 2001, 76(6): 894-899

ISSUE DATE:

2001-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/97054>

RIGHT:

ランダム初期ベクトルサンプリングを用いた ランチョス法による強相関電子系の擬ギャップの研究

姫路工業大学 理学部 坂井 徹¹, 高橋慶紀

高温超伝導体に対する NMR、中性子散乱等の実験で観測されている擬ギャップ現象について、初期ベクトルをランダムサンプリングするランチョス法を用いて解析した。これは基底状態や低エネルギーの励起状態を数値的に厳密に求めるランチョス法と同じメモリーサイズで、有限温度の物理量を計算する手法である。この計算法の有効性について議論する。

1 Introduction

低ドーピング領域の銅酸化物高温超伝導体において、“擬ギャップ”、現象と呼ばれるふるまいが、NMR、中性子散乱、光電子分光等の実験で観測され、注目されている。これは、超伝導転移温度よりも少し高温で、核磁気緩和率 $1/T_1T$ 、磁化率、電気抵抗等の温度依存性に、あたかもスピンギャップに起因するような、ブロードなピークが見られるというもので、ホール濃度が最適値よりも小さい領域（せいぜい十数パーセント前後）でのみ観測されている [1]。この現象の原因としては、反強磁性スピンゆらぎの成長 [2, 1]、超伝導ゆらぎの成長 [3, 4]、あるいはこのふたつのゆらぎの拮抗 [5]、さらにスピノンのシングレット対形成 [6] 等、さまざまな理論が提案されているが、まだ決着は付いていない。我々は、このうち反強磁性ゆらぎの成長によるクロスオーバーとして考える立場から、このギャップ現象と反強磁性スピン相関との関係を t - J モデル

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}) + J \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j), \quad (1)$$

の数値計算により調べている。以下 t をエネルギーの単位とする。

NMR や中性子散乱で観測されたギャップ的振る舞いを見るため、十分小さい ω ($\omega \sim 0.01t$) に対するスピンの動的帯磁率（を q で積分した量）

$$\text{Im}\chi(\omega) = \sum_q \text{Im}\chi(q, \omega). \quad (2)$$

の温度依存性を調べる。また擬ギャップが観測されている静的磁化率 χ についても、温度依存性を求める。そしてこれらの擬ギャップ現象と反強磁性ゆらぎの関係を調べるため、ス

¹E-mail:sakai@sci.himeji-tech.ac.jp

ピン相関関数の $Q \equiv (\pi, \pi)$ 成分

$$S(Q) = \frac{1}{N} \sum_{ij} (-1)^{(\hat{j}-\hat{i}) \cdot (\hat{x}+\hat{y})} \langle S_i^z S_j^z \rangle. \quad (3)$$

についても同様の解析をする。これまでは、ハウスホルダー法による数値的厳密対角化により、上記のような有限温度の物理量を計算してきた。この方法では、対角化する行列のすべての要素をコンピューターのメモリーに収納する必要があるため、せいぜい10サイトの正法格子しか扱えず、擬ギャップが起きうるホール濃度としては $\delta = 0.1$ 、つまり1ホールの系しか計算できなかった。この方法で計算した $S(Q)$ 、 $\text{Im}\chi(\omega)$ 及び χ の温度依存性を図1に示す。パラメータは t を単位としており、高温超伝導体で現実的と考えられている $J = 0.4$ の他に 0.5、0.6 のものも示す。これにより、反強磁性スピンゆらぎの成長するクロスオーバー温度付近で $\text{Im}\chi(\omega)$ 及び χ がギャップ的振る舞いをする事が立証される。

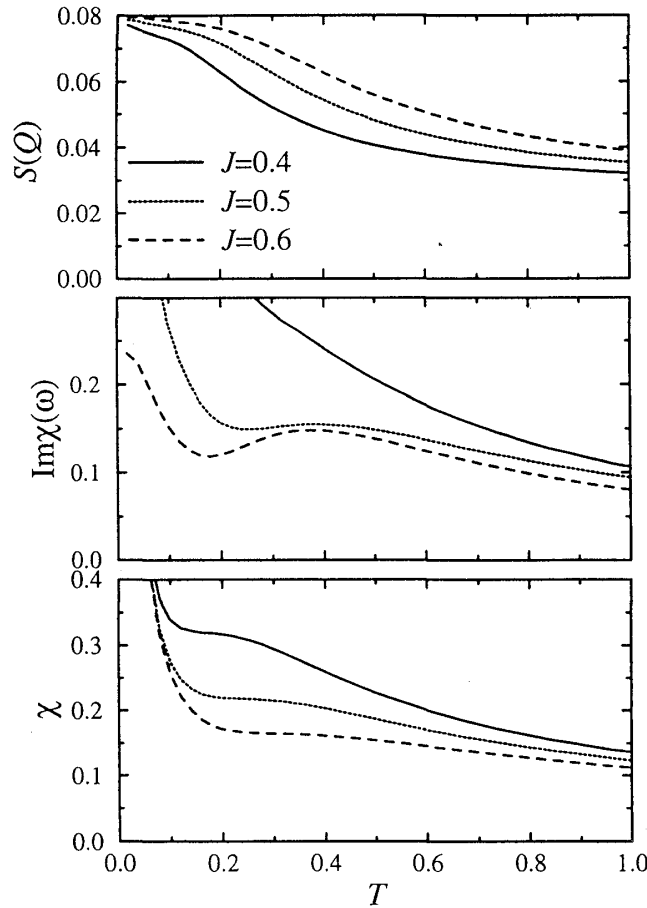


図 1: 10 サイト 1 ホールの t - J モデルの $S(Q)$ 、 $\text{Im}\chi(\omega)$ 及び χ の温度依存性

ところが、1ホール系の計算では基底状態がダブレットであるため、系のシングレット化やホールのペアリングとの関係が全く調べられない。一方、10サイト2ホール系ではホール濃度が大きすぎて擬ギャップ現象は起きない。そこで、もう一回り大きい正方格子である16サイト2ホール系の計算を行う必要が生じてきた。同じ厳密対角化法でこの系を扱うには少なくとも10から20ギガバイトのメモリーが必要で、現実的には難しい。

(最近はこの程度のメモリーを積んだスーパーコンピュータもあるようなので、時間があったらトライしてみたい。)そこで、数年前に Jaklic and Prelovsek[7] によって考案された、初期ベクトルをランダムサンプリングするランチョス法を用いて、この計算を実行した。厳密対角化で有限温度の物理量を計算する場合には、ヒルベルト空間の次元 N に対して N^2 のメモリーサイズが必要となるが、この方法では N 次元のベクトル数本 (最低 2 本) のメモリーがあれば実行可能である。以下のセクションでこの計算方法を簡単にレビューし、その有効性について議論する。

2 方法

このセクションで、Jaklic and Prelovsek が考案した方法を概説する。詳しくは原論文を参照されたい。

簡単のため、ある演算子 A で表される静的物理量の熱平均値を求める問題を考える。そのためには、任意の完全正規直行基底 $|n\rangle$, $n = 1, \dots, N$ について

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta H} A | n \rangle, \quad (4)$$

$$Z = \sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle \quad (5)$$

を計算しなければならない。もしハミルトニアンを完全に対角化して、すべての固有値 E_l 固有ベクトル $|l\rangle$ が求められれば、これを用いて

$$\langle A \rangle = \sum_l e^{-\beta E_l} \langle l | A | l \rangle / \sum_l e^{-\beta E_l} \quad (6)$$

を計算すればよい。ここで、メモリー不足により N 次元の行列が格納できないため、完全な対角化はできないが、 N 次元のベクトル数本なら格納できる場合に、ランチョス法を基礎とした以下のような近似をする。まず、各基底 $|n\rangle$ を初期ベクトルとしてランチョス法による三重対角化を M ステップ行い、直行ベクトルのセット $|\phi_m^n\rangle$, $m = 0, \dots, M$ を

$$H|\phi_0^n\rangle = a_{n0}|\phi_0^n\rangle + b_{n1}|\phi_1^n\rangle, \quad (7)$$

$$H|\phi_m^n\rangle = b_{nm}|\phi_{m-1}^n\rangle + a_{nm}|\phi_m^n\rangle + b_{nm+1}|\phi_{m+1}^n\rangle, \quad (8)$$

...

$$H|\phi_M^n\rangle = b_{nM}|\phi_{M-1}^n\rangle + a_{nM}|\phi_M^n\rangle \quad (9)$$

のように作る。次にこの三重対角行列を対角化して、固有エネルギー ϵ_{nm} 、固有ベクトル $|\psi_m^n\rangle$ を求め、この固有ベクトルのセットを近似的に完全系とみなして式 (4) と (5) を以下のように変形する。

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \sum_m^M \langle n | \psi_m^n \rangle e^{-\beta \epsilon_{nm}} \langle \psi_m^n | A | n \rangle, \quad (10)$$

$$Z = \sum_n^{N_0} \sum_m^M |\langle n | \psi_m^n \rangle|^2 e^{-\beta \epsilon_{nm}} \quad (11)$$

ここでもうひとつの近似として、完全正規直行基底 $|n\rangle$, $n = 1, \dots, N$ のかわりにランダムサンプリングした N_0 個のベクトルを使う。もし、 $N_0 = M = N$ すなわち $|n\rangle$ と $|\psi_m^n\rangle$ が全ヒルベルト空間を尽くせば、厳密な結果が得られる。Jaklic and Prelovsek によれば、 $N_0 \ll N$, $M \ll N$ でも、かなりいい近似値が得られるということである。また、この方法は動的帯磁率のような物理量にも容易に拡張できる。実際、彼らは t - J モデルの 16 サイト 1 ホールの系（ヒルベルト空間の次元は $N=524288$ ）で、optical conductivity を計算し、 $N_0 \sim 700$ としてランチョスステップ M についての収束性を調べ、ある程度低温と高温では $M \sim 100$ 程度で収束するという結果を示している。

我々は、16 サイト 2 ホールの t - J モデルにこの方法を適用し、10 サイト 1 ホールと同じ計算を行ったところ、 $N_0 \sim 100$ に対し、 $M \sim 5000$ 程度で計算値はだいたい収束した。結果を図 2 に示す。これにより、2 ホールの系でも反強磁性相関が成長する温度付近で、擬ギャップ現象が起きるといふ、1 ホール系と同様の結論を得ることができた。ホール濃度が大きくなると擬ギャップ現象が起きる温度は低温にシフトすることもわかるが、これは実験結果とつじつまが合っている。

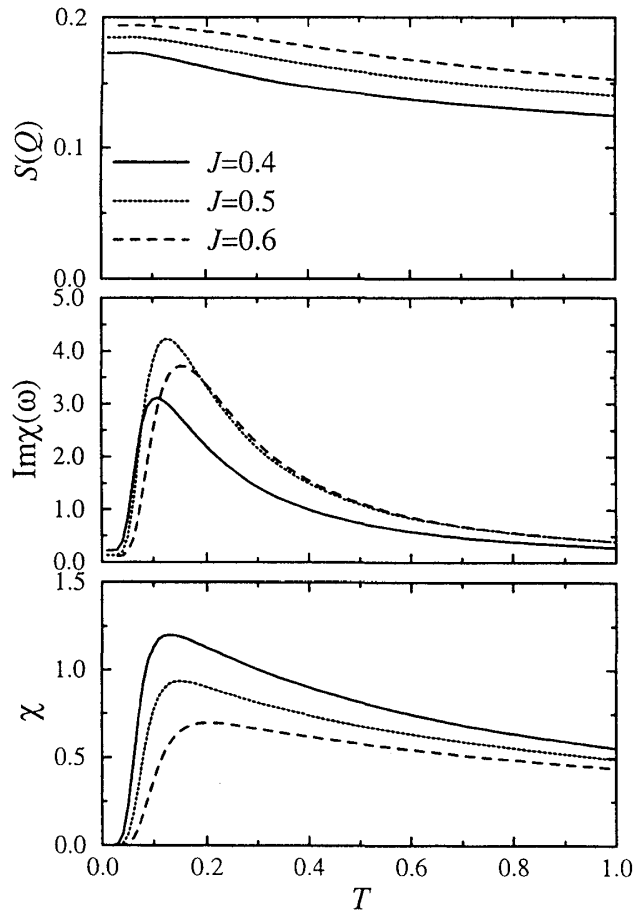


図 2: 16 サイト 2 ホールの t - J モデルの $S(Q)$ 、 $\text{Im}\chi(\omega)$ 及び χ の温度依存性

しかし、この方法の有効性については、解析的な議論は全くされていないうえに、収束した値が正しい値かどうかも確認されていない。そこで、この方法の有効性について検討した結果を次のセクションで議論する。

3 この方法の有効性のチェック

この方法の有効性をチェックするため、10 サイト 2 ホール系 ($J = 0.4$) に対してこの方法で計算した計算した一様帯磁率 χ と、厳密対角化の結果を比較した。この系はヒルベルト空間の次元が $N = 73350$ で、厳密対角化で有限温度の計算が可能である。初期ベクトルのランダムサンプリング数を $N_0 \sim 100$ として (結果はあまり N_0 に依らない)、いくつかのランチョスステップに対して結果の収束性を示したのが図 3 である。結果はだいたい $M \sim 1200$ 程度で収束に向かうが、これを越えると ($M = 1400$) はずれてしまうことがわかった。これは、おそらくヒルベルト空間の次元に対して、ランチョスステップが多すぎて、何らかの保存量のために直行ベクトルが途中で尽きてしまって、そのあとケタ落ちが起こったものと推定される。注目すべきは、低温では (おそらく十分高温でも) 厳密な値に収束していくのに対し、中間の温度領域では厳密解とは異なる値に収束していることである。これは、絶対値の大きい固有値の固有ベクトルに収束するというランチョス法の性質を反映して、非常に低温での振る舞いと非常に高温での振る舞いが強調され過ぎているからだと考えられる。

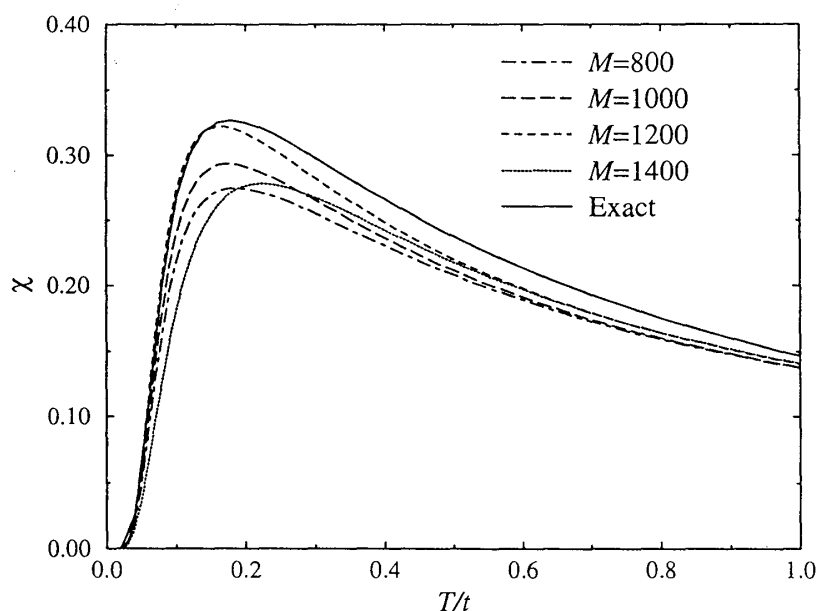


図 3: 10 サイト 2 ホールの t - J モデルの χ の C_1 の温度依存性. M に対する収束性と厳密解との比較

4 まとめ

初期ベクトルをランダムサンプリングするランチョス法を用いて、16 サイト 2 ホールの t - J モデルに対し、 $S(Q)$ 、 $\text{Im}\chi(\omega)$ 及び χ の温度依存性を計算し、高温超伝導体の擬ギャップの起源が、反強磁性スピンゆらぎの成長によるクロスオーバーとして説明できる可能性を示した。この計算法の問題点として、ランチョス法の性質を反映して、低温と高温の性質が強調されすぎて、中間温度領域では正しい値に収束しない場合があることがわかった。今後、この中間温度領域の性質を取り込むための改善策を検討する必要がある。

参考文献

- [1] T. Sakai and Y. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 2630; preprint cond-mat/0010448, to appear in J. Phys. Soc. Jpn. **70** No. 1 (2001) 及びその中の参考文献.
- [2] K. Miyake and O. Narikiyo: J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 3821.
- [3] S. Koikegami and K. Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 1114; Y. Yanase and K. Yamada, *ibid.* **68** (1999) 2999.
- [4] A. Kobayashi, A. Tsuruta, T. Matsuura and Y. Kuroda: J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) 2506.
- [5] S. Onoda and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) 2762.
- [6] T. Tanamoto, K. Kuboki and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **60** (1991) 3072; T. Tanamoto, H. Kohno and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 2739.
- [7] J. Jaklic and P. Prelovsek: Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 3411.